

ных конструкциях будет ограничиваться не образованием вакансионных пор, а комплексом механических свойств и стойкостью в агрессивных средах. Поэтому необходимо направить усилия исследователей на возможность подавления или ослабления тенденции к радиационному набуханию аустенитных хромоникелевых сталей, содержащих 20—30 % Ni (см. рис. 1).

Согласно развитым концепциям представляется [3, 4], что основной путь ослабления вакансионного набухания связан с подбором легирования в целях обеспечения развитого непрерывного однородного распада твердого раствора с сильно выраженным инкубационным периодом и с определенной величиной объемной дилатации, а также обеспечения распада типа упорядочения, K -состояния, расслоения твердых растворов и др.

При создании таких сплавов, разумеется, необходимо обращать внимание и на другие факторы работоспособности материала (длительная прочность, деформационная способность, сопротивление ползучести, коррозионная стойкость и др.), а также на влияние предшествующей обработки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bullough R., Perrin R.— In: Proc. Reading Conf. on Voids Formed by Irradiation of Reactor Materials. Harwell, BNES, 1971, p. 79.

2. Mansur L., Yoo M.— J. Nucl. Mater. 1978, v. 74, N 2, p. 228.
3. Паршин А. М.— Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 1978, вып. 3 (8), с. 34.
4. Горьнин И. В. и др.— В кн.: Реакторное материаловедение. Т. 2. М., изд. ЦНИИАтоминформ, 1978, с. 274—316.
5. Harries D.— In: Proc. BNES Consultant Sympos. on Physics of Irradiation Produced Void, Harwell. 1975, p. 287.
6. Venker H., Ehrlich K.— J. Nucl. Mater. 1976, v. 60, p. 347.
7. Gittus J., Watkin J.— Ibid., 1977, v. 64, p. 300.
8. Bramman J. e. a.— [1], p. 27.
9. Jonston W. e. a.— J. Nucl. Mater., 1974, v. 54, N1, p. 24.
10. Паршин А. М. Структура, прочность и пластичность нержавеющей и жаропрочных сталей и сплавов, применяемых в судостроении. Л., Судостроение, 1972.
11. Куревич И. П., Образцова М. Н., Паршин А. М.— В кн.: Вопросы судостроения. Сер. Металловедение. Вып. 23. Л., Изд-во ЦНИИ «Румб», 1976, с. 18.
12. Горьнин И. В., Куревич И. П., Паршин А. М. В кн.: Жаропрочность и жаростойкость металлических материалов. М., Наука, 1976, с. 167.
13. Arkell D., Williams I.— J. Nucl. Mater., 1978, v. 74, p. 144.

Поступила в Редакцию 08.01.8

УДК 539.171.016:539.2:581.3

О влиянии подпороговых процессов на самодиффузию в металлах под облучением

ГАНН В. В., ВАЙСФЕЛЬД А. М., ЯМНИЦКИЙ В. А.

Как известно, развитие каскада атом-атомных соударений в облучаемом материале завершается этапом релаксации каскадной области. К концу этого этапа локальная упорядоченность решетки восстанавливается настолько, что диффузионные процессы начинают протекать по обычному классическому термоактивационному механизму. Однако в процессе релаксации значительное число атомов каскадной области оказывается вовлеченным в множественные подпороговые соударения. При этом диффузионные процессы протекают по механизму прямой передачи энергии от движущихся атомов к диффузанту. Таким образом, подпороговые процессы могут заметно влиять на диффузионные явления в материалах под облучением, в связи с чем интерес к этим процессам в последнее время заметно усилился [1—3].

Основную роль в процессе самодиффузии по механизму прямой передачи энергии играют колеблющиеся атомы решетки (назовем их нестабильными дефектами), имеющие энергию меньшую E_D , но большую, чем энергия миграции межузельных атомов E_M . Применение метода математи-

ческого моделирования позволит оценить концентрацию нестабильных дефектов, возникающих в никеле под действием различного типа излучений.

Если известны среднее число нестабильных дефектов \bar{k} , приходящихся на один стабильный дефект при данном конкретном типе облучения, и скорость образования последних G , то можно оценить вклад механизма прямой передачи энергии в коэффициент самодиффузии:

$$D_H = \bar{k}Gr^2, \quad (1)$$

где r — средняя длина скачка диффундирующего атома, в качестве которого рассматривается межузельный атом.

Значение D_H можно сопоставить с коэффициентом термодиффузии того же атома

$$D_T = \omega_D \exp\left(-\frac{E_M}{kT}\right) r^2 \quad (2)$$

(здесь ω_D — частота Дебая; k — постоянная Больцмана; T — температура материала) и оценить температуру T^* , ниже которой вклад нестабиль-

ных дефектов в механизм самодиффузии становится определяющим:

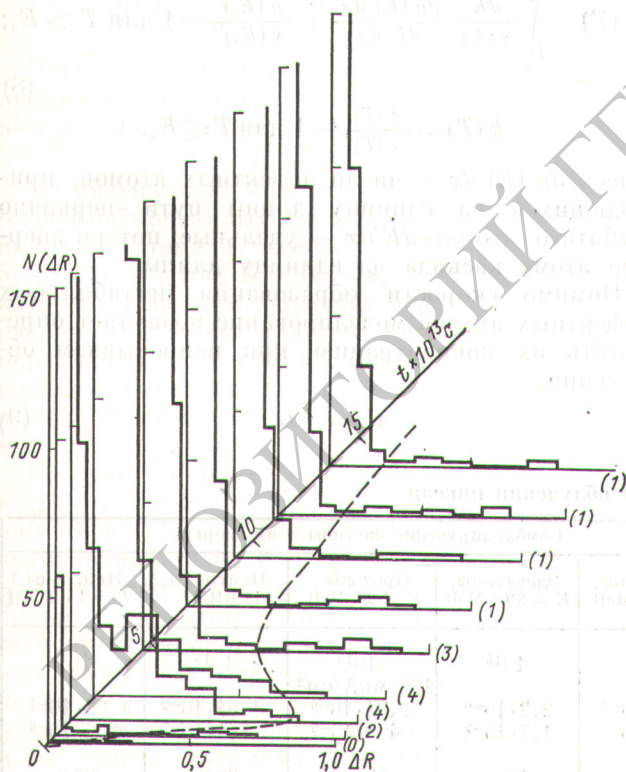
$$T^* = - \frac{E_M}{k} / \ln \frac{\bar{k}G}{\omega_D}. \quad (3)$$

В простейшем случае каскадная теория [4] позволяет оценить \bar{k} по соотношению $\bar{k} = E_D/E_M$. Эта оценка учитывает атомы, получившие в результате развития каскада энергию E_M ; фактически же надо учесть и все атомы, имевшие энергию более E_M . Если использовать предположение о когерентности процесса распространения возмущений в кристалле при энергии менее E_D , то уточненная оценка дает

$$\bar{k} = (E_D/E_M)^{3/2}. \quad (4)$$

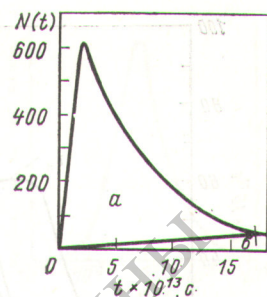
В соответствии с выражениями (3) и (4), приняв для никеля $E_D = 40$ эВ, $E_M = 0,2$ эВ, $\omega_D = 0,6 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$ и $G = 0,75 \cdot 10^{-6}$ смещ./атом \cdot с) для реактора EBR II, получим $\bar{k} \approx 2500$ и $T^* \approx 60$ К.

В связи с тем, что движение атомов каскадной зоны повреждений на этапе ее релаксации является задачей многих тел, оценка (4) должна быть проверена математическим моделированием, для



Р и с. 1. Гистограммы отклонений атомов микрокристаллита от равновесных положений $N(\Delta R)$ в процессе развития каскада в никеле, инициируемого первично выбитым атомом энергией 350 эВ: t — время с момента образования первично выбитого атома, цифры в скобках — число атомов, смещенных более чем на одну постоянную решетки (ΔR в единицах постоянной решетки никеля)

Р и с. 2. Изменение полного числа дефектных атомов в процессе развития каскада в никеле, инициируемого первично выбитым атомом энергией 350 эВ; a, b — зоны нестабильных и стабильных дефектных атомов

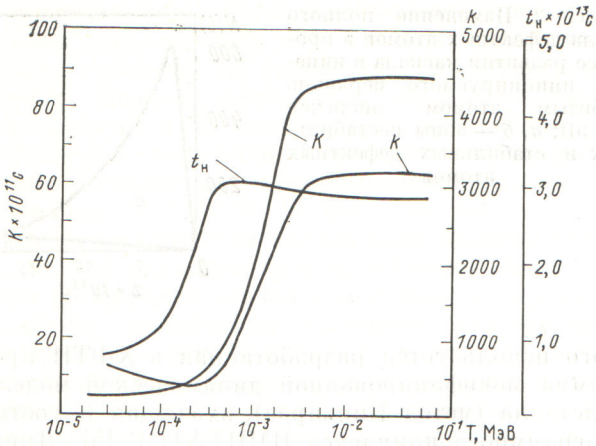


этого используется разработанная в ХФТИ программа модифицированной динамической модели кристалла (метод Виньярда), входящая в состав программного комплекса ИМИТАТОР [5]. Динамический метод позволяет промоделировать процесс релаксации каскадной области с учетом коллективных эффектов и оценить среднюю концентрацию нестабильных дефектов в кристалле под облучением. Недостатком динамического метода является ограничение объема микрокристаллита из-за доступной оперативной памяти ЭВМ. Так, при использовании БЭСМ-6 максимальный объем модельного микрокристаллита не должен превышать ~ 3000 атомов. Такой микрокристаллит обеспечивает развитие каскада от первично выбитого атома с $E_s \approx 350$ эВ, при большей энергии этот атом выходит за пределы микрокристаллита.

Для расчета был выбран микрокристаллит, состоящий из 2240 атомов, вдоль наиболее длинной оси которого (около 15 постоянных решетки) направлялся первично выбитый атом, имеющий заданную энергию E . Если эта энергия превышала E_s , то исходный атом не рассматривался после его выхода из микрокристаллита. Динамику развития каскада в микрокристаллите прослеживали вплоть до его затухания (рис. 1). В процессе моделирования каскада для каждого момента времени регистрировали число «дефектных» атомов $N(t, E)$, полная энергия которых (сумма потенциальной и кинетической энергии) отличается от энергии атома невозмущенного микрокристаллита более чем на E_M .

Моделирование оканчивается в момент времени $t_{ст}$, который определяется стабилизацией $N(t, E)$, приближающейся к числу стабильных дефектов $N_{ст}$. Одновременно определяли полное число атомов $n(E)$, которые хотя бы один раз за время развития каскада в пределах микрокристаллита были зарегистрированы как дефектные. На промежуточных этапах расчета не различали нестабильные и стабильные дефектные атомы; такое разделение проводилось после окончания развития очередного каскада (рис. 2).

С учетом сказанного скорость образования нестабильных дефектных атомов при заданном конкретном спектре первично выбитых атомов



Р и с. 3. Зависимости импульса числа нестабильных дефектных атомов K , числа нестабильных дефектных атомов k , отнесенные к числу стабильных дефектных атомов, и зависимость времени жизни нестабильного дефектного атома t от энергии первично выбитого атома в никеле

$\langle d\sigma/dT \rangle$ может быть определена как

$$G_H = \bar{k}G, \quad (5)$$

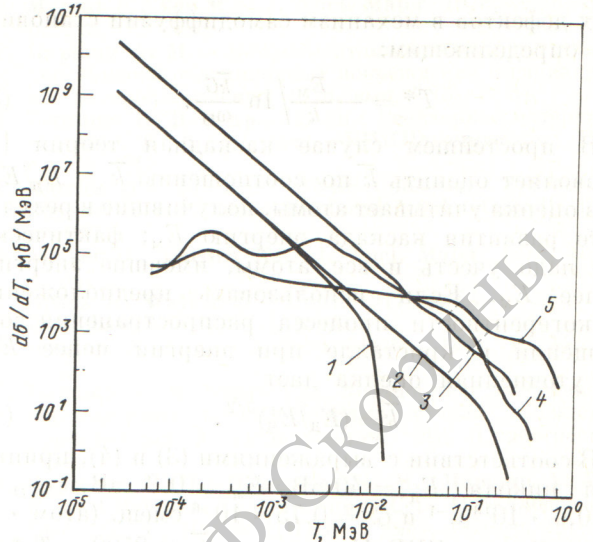
где

$$G = \Phi_0 \int_{E_d}^{T_{\max}} dT \langle \frac{d\sigma}{dT} \rangle v(T) - \quad (6)$$

скорость образования стабильных дефектов; Φ_0 — поток исходных частиц; T_{\max} — максимальная энергия первично выбитого атома; $v(T)$ — каскадная функция;

$$\bar{k} = \frac{\Phi_0}{G} \int_{E_{\max}}^{T_{\max}} dT \langle \frac{d\sigma}{dT} \rangle v(T) k(T), \quad (7)$$

произведение $v(T) k(T)$ определяет полное число дефектных атомов в каскаде, образованном пер-



Р и с. 4. Спектры первично выбитых атомов в никеле ($1 \text{ б} = 10^{-28} \text{ м}^2$)

вично выбитым атомом с энергией T , и

$$k(T) = \int_{E_s}^T \frac{dE}{v(E)} \frac{dn(E)/dx}{dE/dx} + \frac{n(E_s)}{v(E_s)} - 1 \text{ для } T > E_s; \quad (8)$$

$$k(T) = \frac{n(T)}{v(T)} - 1 \text{ для } T \leq E_s.$$

Здесь $dn(E)/dx$ — число дефектных атомов, приходящихся на единицу длины пути первично выбитого атома; dE/dx — удельные потери энергии атома каскада на единицу длины.

Помимо скорости образования нестабильных дефектных атомов моделирование позволяет определить их концентрацию при непрерывном облучении:

$$C = \bar{K}G, \quad (9)$$

Каскады пяти вариантов облучения никеля

Характеристики	Бомбардирующие частицы и их энергия				
	Электроны, $E = 20 \text{ МэВ}$	Электроны, $E = 300 \text{ МэВ}$	Протоны, $E = 20 \text{ МэВ}$	Нейтроны, EBR II	Нейтроны, $E = 14 \text{ МэВ}$
Плотность потока частиц, нейтр./ $(\text{см}^2 \cdot \text{с})$	10^{15}	10^{15}	10^{15}	10^{15}	10^{15}
Средняя энергия первично выбитых атомов, МэВ	$1,98 \cdot 10^{-6}$	$2,2 \cdot 10^{-6}$	$2,91 \cdot 10^{-6}$	$1,54 \cdot 10^{-2}$	$1,26 \cdot 10^{-1}$
Скорость создания стабильных дефектных атомов G , смещ./ $(\text{атом} \cdot \text{с})$	$1,6 \cdot 10^{-7}$	$1,7 \cdot 10^{-7}$	$4,9 \cdot 10^{-6}$	$7,4 \cdot 10^{-7}$	$2,0 \cdot 10^{-6}$
Среднее число нестабильных дефектных атомов, приходящихся на один стабильный, \bar{k}	850	1200	1300	3200	3600
Усредненный импульс числа нестабильных дефектных атомов, приходящийся на один стабильный \bar{K} , с	$1,7 \cdot 10^{-10}$	$2,6 \cdot 10^{-10}$	$3,1 \cdot 10^{-10}$	$9,0 \cdot 10^{-10}$	$9,2 \cdot 10^{-10}$
Средняя концентрация нестабильных дефектных атомов C , смещ./атом	$2,7 \cdot 10^{-17}$	$4,5 \cdot 10^{-17}$	$1,5 \cdot 10^{-15}$	$6,6 \cdot 10^{-16}$	$1,8 \cdot 10^{-15}$

где

$$\bar{K} = \frac{\Phi_0}{G} \int_{E_{\text{макс}}}^{T_{\text{макс}}} dT \left\langle \frac{d\sigma}{dT} \right\rangle v(T) K(T); \quad (10)$$

произведение $v(T) K(T)$ определяет импульс числа нестабильных дефектных атомов в каскаде, образованном первично выбитым атомом с энергией T , и

$$K(T) = \int_{E_s}^T \frac{dE}{v(E)} \frac{d\eta(E)/dx}{dE/dx} + \frac{\eta(E_s)}{v(E_s)} \quad \text{для } T > E_s; \quad (11)$$

$$K(T) = \frac{\eta(T)}{v(T)} \quad \text{для } T \leq E_s.$$

Здесь $d\eta(E)/dx$ — импульс числа нестабильных дефектных атомов, приходящийся на единицу длины пути первично выбитого атома; $\eta(E)$ — импульс числа нестабильных дефектных атомов, образованных в микрокристаллите первично выбитым атомом с энергией E (см. рис. 2):

$$\eta(E) = \int_0^{t_{\text{ст}}} N(t, E) dt - \frac{1}{2} N_{\text{ст}} t_{\text{ст}}. \quad (12)$$

Определенный интерес представляет и среднее время жизни нестабильных дефектных атомов, которое может быть определено как

$$\bar{t}_n = \bar{K}/k. \quad (13)$$

Математическое моделирование проводили для ряда фиксированных значений энергии первично выбитого атома в никеле ($E = 0,3; 0,5; 1; 3; 5; 10; 30; 50; 100; 350$ эВ и $1; 3; 5; 10; 30; 50; 100$ кэВ). При каждом значении моделировалось три различных каскада для трех направлений вылета первично выбитого атома. На основании моделирования находили усредненные значения $n(E)$ и $\eta(E)$ при $E \leq E_s$, а также $dn(E)/dx$ и $d\eta(E)/dx$ при $E > E_s$.

На рис. 3 представлены зависимости k , K и $t_n = K/k$ от энергии E , вычисленные по формулам (8) и (11) с использованием результатов моделирования. При $E > 1 \div 3$ кэВ значения k и K стабилизируются, т. е. полное число нестабильных дефектных атомов и импульс их числа становятся пропорциональными числу стабильных дефектных атомов, независимо от энергии первично выбитого атома. Значение t_n становится независимым от энергии E примерно с 200 эВ и составляет около двух периодов частоты Дебая. Зависимости $k(E)$ и $K(E)$ позволяют вычислять среднюю концентрацию нестабильных дефектных атомов для любого спектра первичных частиц методом численного интегрирования без пересчета каскадов.

Рассматривалось образование нестабильных дефектных атомов в никеле для пяти случаев облу-

чения (рис. 4): электронами энергией 20 (1) и 300 МэВ (2), протонами энергией 20 МэВ (3), нейтронами быстрого реактора EBR II (4) и нейтронами энергией 14 МэВ (5). Спектры первично выбитых атомов для этих случаев также получены методом математического моделирования с использованием ядерных моделей упругого и неупругого рассеяния [6].

Результаты расчетов для плотности потока первичных частиц 10^{15} нейтр./ $(\text{см}^2 \cdot \text{с})$ представлены в таблице, из рассмотрения которой следует, что при переходе ко все более жестким спектрам первично выбитых атомов (от электронов энергией 20 МэВ к нейтронам энергией 14 МэВ) одновременно с ростом средней энергии первично выбитых атомов возрастает концентрация нестабильных дефектных атомов, усредненный импульс их числа и число нестабильных дефектных атомов, приходящихся на один стабильный. Среднее время жизни нестабильных дефектных атомов во всех рассматриваемых случаях составляло $(2 \div 3) \cdot 10^{-13}$ с, а $T^* = 60 \div 70$ К, что согласуется с оценкой выражения (4).

На рис. 5 изображена зависимость сечения выхода нестабильных дефектных атомов от энергии первично выбитых атомов при облучении никеля нейтронами EBR II. Хорошо видно, что наибольшее число нестабильных дефектных атомов в этом случае создают первично выбитые атомы энергией от 3 до 30 кэВ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Doran D., Shiffgens J.— In: Proc. of the Workshop on Correlation of Neutron and Charged Particles Damage. Oak Ridge, National Laboratory, 8—10 June 1976, p. 3, CONF-760673.
2. Инденбом В. Л.— Письма в ЖЭТФ, 1979, т. 5, вып. 8, с. 489.
3. Гани В. В., Вайсфельд А. М., Ямницкий В. А.— Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение, 1979, вып. 3(11), с. 16.
4. Томпсон М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. М., Мир, 1971.
5. Гани В. В., Вайсфельд А. М., Ямницкий В. А.— [3], 1980, вып. 1 (12), с. 13.
6. Шияев Б. А. и др.— Атомная энергия, 1978, т. 45, вып. 3, с. 193.

Поступила в Редакцию 19.06.80

